



TITLE:

クラスターの科学-C\_<60>・フラーレンを中心に(第37回物性若手夏の学校(1992年度),講義ノート)

AUTHOR(S):

斎藤, 晋; 山内, 淳

---

CITATION:

斎藤, 晋 ...[et al]. クラスターの科学-C\_<60>・フラーレンを中心に(第37回物性若手夏の学校(1992年度),講義ノート). 物性研究 1993, 60(5): 443-444

ISSUE DATE:

1993-08-20

URL:

<http://hdl.handle.net/2433/95163>

RIGHT:

相が説明できる。電子数を half-filled より少し減らした場合の有効ハミルトニアンとして次の  $t$ - $J$  モデルがよく議論される。

$$\mathcal{H} = -t P_d \sum_{\langle ij \rangle} (c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} + h.c.) P_d + J \sum_{\langle ij \rangle} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j$$

しかし、ハバードモデル、 $t$ - $J$ モデルは強相関電子系であるために一般的には解けない。そこで、いくつかの近似理論について話した。本講義で取り上げたのは、RPA 近似、ハバード近似、グッツヴィラー近似、スレーヴ粒子近似である。

一方、最近発展の著しい計算機実験についても話した。正確にハミルトニアンを対角化しようとすると、10 ~ 20 サイトで計算できなくなる。そこで、もっと大きい系を扱えるように発展したのが量子シミュレーションである。ここでは補助場法によるシミュレーション、すなわち密度行列を Trotter 分解し、さらに Stratonovich-Hubbard 変換を導入して、補助場についての和をモンテカルロサンプリングに置き換えられる事によって計算する方法を紹介した。

これらの研究により、2次元の強相関系の振る舞いもかなり分かってきた。実験事実と良い一致を示す結果としては、たとえばハバードモデルのスピン相関を解析する事により half-filled のときに有限の  $U$  に対しても、反強磁性相が存在するであろうということ、しかしホールドーピングによって、大変小さな濃度で、その長距離秩序が消え、インコメンシュレートな短距離スピン相関が生じることなどが挙げられた。また、half-filled で電荷ギャップが存在し、それと関連してドーブした系の状態密度の発散が見られることから、光学伝導度のバンド端近傍での異常やドルーデ的なピークのドーピング量依存性との共通点が指摘された。

しかし、ハバードモデルや  $t$ - $J$ モデルでは理解できそうもない現象もあり、これからの発展が待たれる所である。

(文責 津留崎 恭一)

## クラスターの科学 - $C_{60}$ ・フラーレンを中心に -

日本電気基礎研 斎藤 晋

クラスターは、既存の種々の科学の分野の境界領域にある新しい研究対象である。「クラスター」という言葉の科学的に厳密な定義はまだない。ただ、ある程度のコンセンサスは得られつつあり、2個以上  $10^4$  個程度の原子・分子の凝集系に対して一般に用いられている。以下では、稀ガス、金属、半導体の各クラスターについて簡単に解説する。

### 1 希ガス クラスター

キセノンクラスター  $Xe_N$  の質量スペクトルでは、 $N=13, 55$  等にはっきりとしたピークが現れ、それらのクラスターが他と比べてでやすいことを示している。質量スペクトルの中の明瞭なピークを与える  $N$  は、しばしば「魔法数 (マジックナンバー)」と呼ばれ、そのクラスターの性質を理解する鍵となるものとして注目されてきた。 $Xe_N$  で見られた魔法数は、 $Ar_N$  でも観測されている。これらは、実は正 20 面体を作るのに必要な原子数であり、一般に希ガスクラスターは正 20 面体形の充填構造を取るものと考えられている。このことは、レナード・ジョーンズポテンシャルを用いた計算機実験からも支持されている。

### 2 金属 クラスター

希ガス同様、その固体相で配位数の多い結晶構造を取る金属元素のクラスターはどのような構造を取っているのだろうか。実は、その構造はまだよくわかっていないことが多い。ただ、アルカリ金

属や貴金属のクラスターの質量スペクトルからその価電子系の構造についての非常に興味深い事実が明かとなった。すなわち、殻構造と呼ばれているもので、1原子内の電子や、原子核中の陽子・中性子等と同様、小数フェルミ粒子系に特徴的なものである。例えばナトリウムクラスター $Na_N$ の質量スペクトルでは $N=8, 20, 40$ などをマジックナンバーに持つ。この殻構造は、クラスター中の原子核の配置にはあまり敏感には依存しないものと考えられている。原子核中の核子との殻構造を通しての類似性は、その後、励起スペクトルでも見つかっている。すなわち、原子核の巨大双極子共鳴に相当する励起がナトリウムクラスターなどでも観測されている。これは、一種の集団励起であり、その理論的研究は、局所密度近似に時間依存性を入れて行われている。

### 3 半導体 クラスタ及びフラーレン

炭素などのIV族元素の(半導体)クラスターでは、方向性の強い共有結合が原子間の凝集の起源と考えられるので、金属クラスターの場合とは異なり、原子核の配置に強く依存した電子構造を持つものと推測される。また、その凝集力を原子間のポテンシャルに焼き直した場合、希ガスクラスターに用いたような2体の中心力ではなく、3体力以上の複雑な項が効いてくるものと予想される。この様な事情から、半導体クラスターの一般論の構築は遅れており、クラスター科学の中でも難しい分野の一つである。ただ、IV族の中でも、炭素クラスター $C_N$ に関しては、 $N > 30$ では籠状のフラーレン構造を取ることが明かとなりつつあり、その理解が急速に進みつつある。

炭素クラスターは、 $N$ が10程度までは直線状に炭素原子が連なった形を取るものと考えられている。そして、 $N$ が10程度からその両端がつながって円環状になるものと考えられている。 $N$ がそれ以上では、フラーレンが安定となるものとされている。ただ、これらの構造の移り変わりははっきりとした臨界サイズがあるわけではなく、2種の形がビーム中で共存しているものもあるものと考えられる。

炭素クラスターがこの様に種々の構造を取り得るのは、C原子が $sp, sp^2, sp^3$ 混成と様々な電子状態を取ることができるからであろう。 $C_{60}$ の電子状態は定性的には、球面上の電子の電子状態と類似している。 $C_{60}$ 固体となってもクラスターとしての軌道準位の性格はかなり保たれている。 $t_{1u}, t_{1g}$ 由来のバンドの間にギャップが開き半導体となっている。最近では、金属を取り込んだフラーレン(メタロフラーレン)が実験で観測されている。幾何学的及び局所密度汎関数法に基づく理論計算から $C_{60}$ に小さなクラスターが金属を取り込みつつかぶさり、だるま型のメタロフラーレンが生成するモデルを提唱した。このモデルは、幾何学形状及びエネルギー的に $C_{60}$ 1分子あたりに取り込まれる金属原子数の上限を予測するが、これは、実験事実とコンシステントである。

本稿は、斎藤先生の「物性若手夏の学校 テキスト」原稿を要約加筆したものであることをお断りしておく。

(文責 山内 淳)

## 量子マイクロ構造における電子伝導

東大先端研 榊 裕之

最近10年来のICの集積化技術の進展は著しい。その結果発展したサブミクロン加工技術により、量子力学的効果が直接顔を出す様な極めて小さな半導体の構造を作成し、そこでの電子の振る舞いが精力的に調べられてきた。今回の講義ではそれら諸研究が概観された。

### 1 閉込めと電子状態の次元性

ダブルヘテロ型量子井戸構造と単一ヘテロ型電界閉込めについて説明があり、いわゆる低次元電子系の成立条件が示された。また広い量子井戸での次元性のクロスオーバーが論じられシュブニコフ振